Dipartimento di Matematica e Informatica

Denise Cilia

X81000791

Il modello di Ehrenfest

1. Catene di Markov

Si definisce Catena di Markov a tempo discreto (DCTM) un processo stocastico formalmente definito da un insieme di variabili aleatorie $\{X_t\}$, dove il parametro t $\in \mathbb{N}$, che soddisfano le seguenti proprietà:

I. Proprietà di Markov o Memory-less

Dato lo stato corrente X_t, l'esito di ogni stato futuro X_y, con $y > t$, non dipende dalla sua storia passata, $\{X_u : u < t\}$, ma solo da quello presente.

$$P(X_{n+1} = j | X_0, X_1, \ldots, X_n) = P(X_{n+1} = j | X_n).$$

II. L'insieme dei valori assunti dalle variabili aleatorie X_t, è un insieme finito e si definisce spazio degli stati.

L'evoluzione del sistema è descritta dalla probabilità di transizione **ad un passo** che è una matrice Q, nella quale gli elementi $q_{i,j}(n)$ descrivono lo spostamento del sistema dallo stato j al tempo successivo $n+1$, supposto che al tempo n si trovi nello stato i.

$$q_{i,j}(n) = P(X_{n+1} = j | X_n = i) \quad i, j, n = 0, 1, 2\ldots$$

Più in generale vale il seguente teorema:

Teorema. Sia $q_{i,j}^{(s)}$ la probabilità di transizione da uno stato i ad uno j ad **s passi**,

$$q_{i,j}^{(s)} = P(X_{n+s} = j | X_n = i),$$

$$s = 1, 2, \ldots$$

Allora la matrice di transizione $Q^{(s)}$, i cui elementi sono $q_{i,j}^{(s)}$ è data da,

$$Q^{(s)} = Q^s$$

1.1 Evoluzione temporale

Sia E l'insieme degli stati di una catena di Markov e supponiamo che esso sia infinito oppure di cardinalità m. Poiché le variabili aleatorie X_n al tempo n, assumono valori in E, le probabilità che uno stato di E sia occupato, sono caratterizzate da un vettore riga di dimensione pari alla cardinalità dell'insieme E, $v = (v_1, v_2, \ldots)$, con

$$v_k = \mathrm{P}(X_n = k)$$

Supponiamo che al tempo $n = 0$ X_0 abbia legge data dal vettore v: è possibile calcolare al tempo n la legge w per X_n. Infatti

$$w_k = \mathrm{P}(X_n = k) = \Sigma_{h\in E}\, \mathrm{P}(X_n = k \mid X_0 = h)\mathrm{P}(X_0 = h) = \Sigma_{h\in E}\, q_{hk}^{(n)} v_h$$

cioè i due vettori v e w sono legati dalla relazione

$$w = vQ^n$$

Ci interessa studiare una catena di Markov per tempi molto grandi. In questi casi, la probabilità di trovare la catena in uno stato j, p_j, non dipende dallo stato iniziale

$$\lim_{n\to\infty} \mathrm{P}(X_n = j \mid X_0 = i) = \lim_{n\to\infty} q_{i,j}^{(n)} = p_j \quad i, j = 0, 1, \ldots$$

Quando le probabilità limite p_j esistono e la loro somma risulta uno, vengono definite **distribuzione di equilibrio** o **distribuzione dello stato stazionario** di una catena di Markov. Vale il seguente teorema:

Teorema di Markov. Data una catena di Markov il cui insieme degli stati è finito e pari ad N, con matrice di transizione Q regolare[1], allora esiste ed è unica la probabilità invariante[2] $p = (p_1, p_2, \ldots, p_n)$ di Q tale che

$$\lim_{n\to\infty} q_{ij}^{(n)} = p_j$$

Il teorema precedente ci garantisce che esiste la probabilità limite ed è inoltre invariante per Q. Per calcolarla bisogna risolvere il seguente sistema lineare vincolato:

$$p_j = \Sigma_{i \in E}\, p_i q_{i,j}$$ (**equazione di bilancio**[3])

$$\Sigma_{j \in E}\, p_j = 1$$ (**equazione di normalizzazione**)

Infine concludiamo definendo una classe importante di catene di Markov, che trova molte applicazioni fisiche, le catene **reversibili**.

Definizione. Una catena di Markov è reversibile se la probabilità di una qualsiasi sequenza $(X_0, X_1, \dots, X_n)$ è la stessa della sequenza speculare ovvero $(X_n, X_{n-1}, \dots, X_9)$. Condizione necessaria e sufficiente per la reversibilità è che le probabilità di transizione soddisfino la condizione di bilancio:

$$p_i q_{ij} = p_j q_{ji}$$

---

[1] Una catena di Markov si definisce **regolare** se esiste un intero positivo m, tale che $q_{i,j}^{(m)} > 0\ \forall i, j \in E$, cioè se esiste un percorso che connette gli stati.

[2] Sia v una probabilità su E: allora essa si dice **invariante** se accade $v = vQ$, cioè la probabilità di occupazione della matrice Q a tempo n coinciderà con il tempo iniziale.

[3] Numero medio di transizioni $j \to i \simeq i \to j$.

2. Introduzione al modello di Ehrenfest

Il modello di Ehrenfest della diffusione è un modello markoviano, proposto per poter spiegare e chiarire l'interpretazione statistica alla base del secondo principio della termodinamica, secondo cui molti eventi termodinamici sono irreversibili. Consideriamo N molecole in due contenitori, chiamate rispettivamente A e B. Lo stato del sistema ad un tempo t è descritto dal valore $k(t)$ di molecole nel contenitore A (e quindi N-k è il numero di molecole in B). Ad ogni tempo (discreto) una molecola viene scelta a caso e spostata nell'altro contenitore. Essendo il modello un processo markoviano, descriviamo la sua matrice di transizione Q. Essa assume valori non nulli solo sulle linee adiacenti alla diagonale, avremo dunque:

$$Q_{\mathrm{k,k\text{-}1}} = k/N \qquad \textbf{(2.1)}$$

$$Q_{\mathrm{k,k+1}} = (N\text{-}k)/N$$

mentre i restanti elementi della matrice saranno nulli. Al tempo t+1 avremo due possibilità:

$$\mathrm{P}\{X(t+1) = k+1 \mid X(t) = k\} = (N\text{-}k)/N \; (A \rightarrow B)$$

oppure

$$\mathrm{P}\{X(t+1) = k\text{-}1 \mid X(t) = k\} = k/N \; (B \rightarrow A)$$

Le relazioni precedenti ci dicono che la probabilità di saltare a sinistra è maggiore di quella di saltare a destra per $k > N/2$ (e viceversa). Il problema principale posto da tale problema è il seguente: esiste una distribuzione limite per tempi molto lunghi?

La distribuzione stazionaria p_k (probabilità di avere k molecole nel contenitore *A* a tempi lunghi) può essere ottenuta attraverso il seguente metodo:

$$p_0 = Q_{1,0}p_1$$

$$p_1 = Q_{0,1}p_0+Q_{2,1}p_2$$

$$p_2 = Q_{1,2}p_1+Q_{3,2}p_3$$

e così via. Questo sistema di equazioni può essere risolto in maniera iterativa partendo dalla prima equazione e tenendo p_0 come parametro fissato (caso base). Tenendo conto delle eguaglianze precedenti ovvero la **(2.1)**:

$$p_1 = Np_0$$

$$p_2 = N(N-1)/2\ p_0$$

$$p_3 = N(N-1)(N-2)/3\cdot 2\ p_0$$

E quindi in generale $p_k = p_0\ N!/[k!(N-k)!]$. Inoltre la condizione di normalizzazione richiede $p_0 = ½^N$ per cui la distribuzione stazionaria è binomiale. Ciò significa che dopo molti passi la distribuzione è la stessa che si otterrebbe mettendo ogni molecola nel contenitore *A* o *B* con la stessa probabilità ½.

3. Implementazione del modello

Per implementare il modello di Ehrenfest è stato utilizzato Processing, un linguaggio di programmazione. All'esecuzione del programma viene visualizzata una finestra con due contenitori. È possibile scegliere tra due stati iniziali:

Il primo dispone N oggetti, in questo caso rappresentati come palline, nel contenitore a sinistra. Una volta inseriti, viene avviata l'estrazione che consiste nello scegliere una pallina a caso da uno dei due contenitori.

Il secondo dispone $N/2$ oggetti nel contenitore a sinistra e nel contenitore a destra. Una volta inseriti, viene avviata l'estrazione.

Di seguito delle immagini che mostrano il comportamento dell'applicazione:

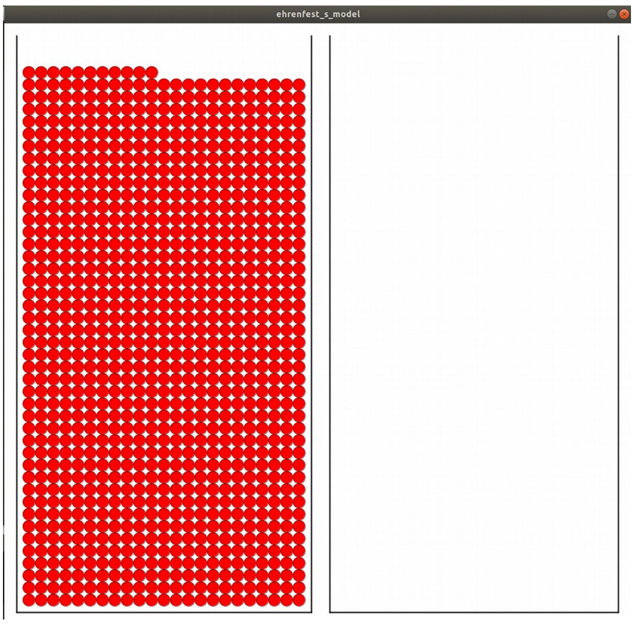

Figura 1. Stato iniziale N = 1000

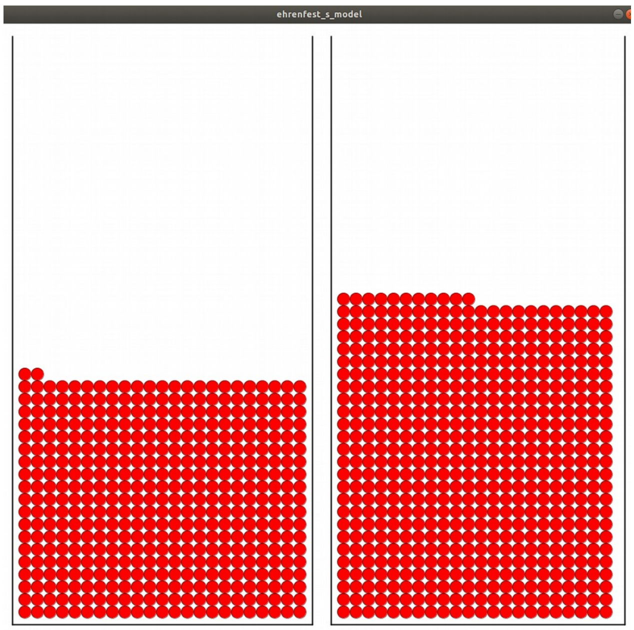

Figura 1.1 Stato finale dopo 6000 estraz.

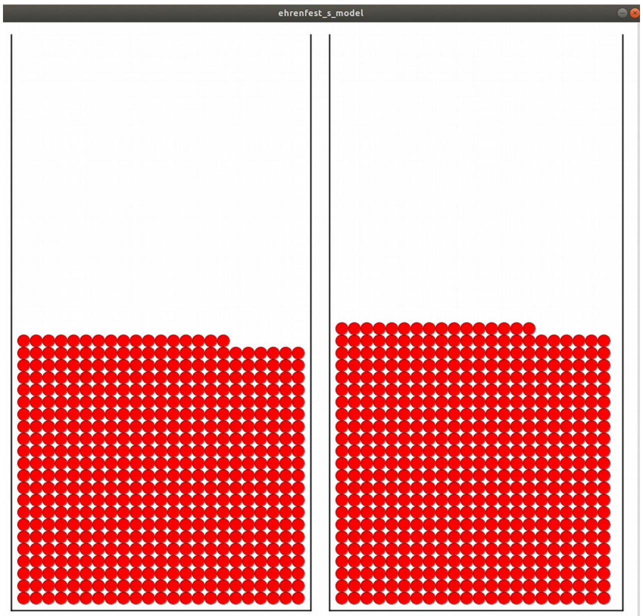

Figura 2. Stato iniziale N/2 a sx e a dx

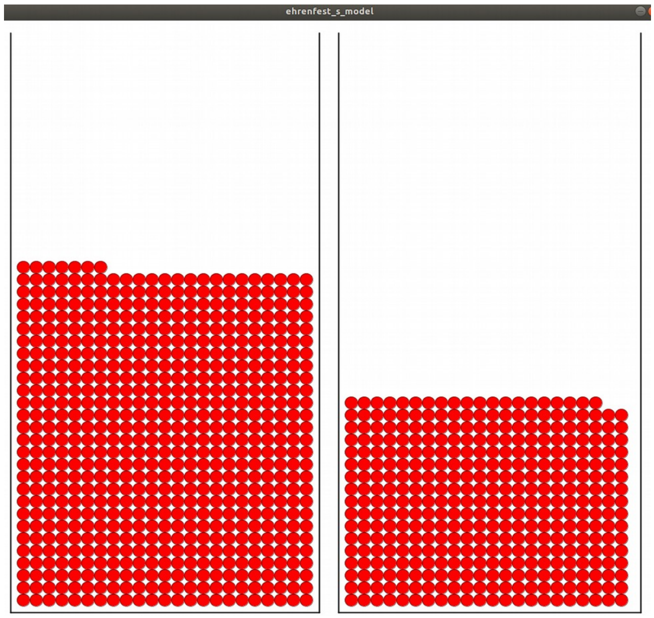

Figura 2.1 Stato finale dopo 6000 estraz.

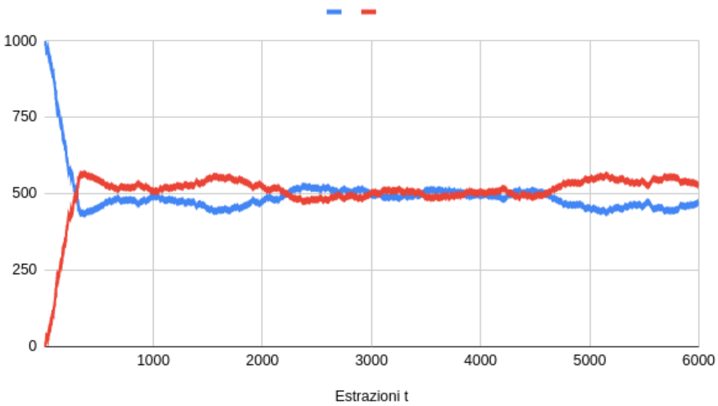

Figura 1.2 Osservazione palline presenti nei contenitori sinistro e destro all'estrazione t

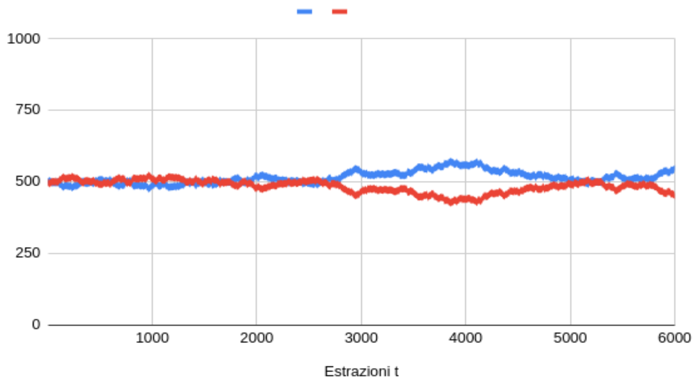

Figura 2.2 Osservazione palline presenti nei contenitori sinistro e destro all'estrazione t

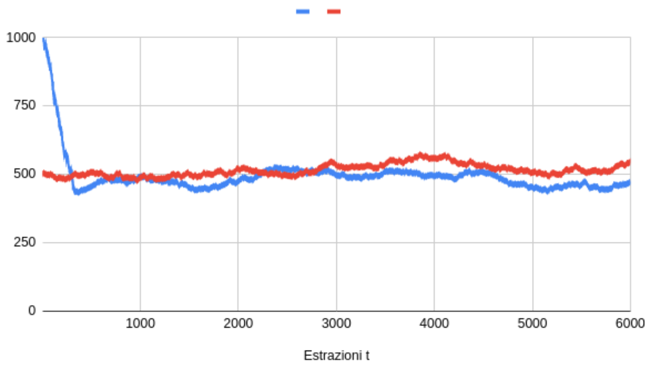

Figura 3. Osserv. sui contenitori a sx rispettivamente con stato iniziale N e N/2.

Bibliografia

Prof. O. Muscato, Appunti del corso MMS – 2021

G. Boffetta, A. Vulpiani, Probabilità in Fisica e Astronomia –

Springer, 2012